

Influencia de la orientación y el tamaño de grano de los cristalitas de Al y Fe sobre el alcance de los iones He^{2+}

Justo Rojas^{1,2,*}, Modesto Montoya¹

¹ Instituto Peruano de Energía Nuclear, Departamento de Física, Av. Canadá 1470, Lima 41, Perú

² Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Apartado Postal 4-0149, Lima 14, Perú

Resumen

Presentamos los resultados preliminares del estudio mediante la simulación con dinámica molecular de los mecanismos de la pérdida de energía y la distribución del alcance de los iones durante la irradiación de Al y Fe con He^{2+} . Los resultados muestran que la estructura cristalina, en particular la orientación del cristal, tiene un claro efecto sobre el alcance de los iones. Para los materiales policristalinos, con relación a la influencia del tamaño de granos sobre el alcance de los iones y poder de frenado del material, solo en la región de los nanómetros se observa una dependencia apreciable.

Abstract

We present the preliminary results of the study by molecular dynamics simulation of the mechanisms of energy loss and the distribution of ion range during the irradiation of Al and Fe with He^{2+} . The results show that the crystal structure, in particular the orientation, clearly has effect on the ion range. For polycrystalline materials, regarding the influence of grain size on the ion range and energy deposition, only for grain sizes about 10-100 nm shows a significant dependence.

1. Introducción

Los procesos de interacción de las partículas energéticas cargadas, como las partículas alfa (He^{2+}), con los diversos materiales son de interés debido a la posibilidad de modificar la estructura, fundamentalmente las capas superficiales, mediante la generación de defectos, desorden atómico, amorfización, nanoestructuración [1-3]. El estudio de aleaciones para la conservación y transporte de materiales radioactivos, es un tema que reviste actualidad [4]. Otra área de mucha importancia tecnológica, relacionado con la propagación de los iones en el material, es la implantación iónica de metales y aleaciones y dopado de semiconductores [5,6]. Usualmente la energía de implantación varía desde decenas de keV hasta MeV. El rango o alcance de implantación depende tanto de la masa y energía del proyectil como de la masa de los átomos del sustrato, la estructura cristalina y orientación del ángulo de incidencia del proyectil.

La simulación con el método de Dinámica Molecular (DM), usando diferentes modelos de potenciales ha demostrado ser una herramienta de mucha utilidad en el estudio de interacción del ion con los diferentes

materiales [7,8].

Teniendo en cuenta la posibilidad de emprender un estudio de materiales más complejos, en el presente trabajo se presenta la implementación del código de DM, MDRANGE [9] aplicado al estudio de la propagación de los iones He^{2+} en los metales de Fe y Al. El objetivo es aclarar el efecto de las orientaciones del cristallito y la influencia del tamaño de grano sobre las magnitudes como el alcance y distribución de los iones.

2. Metodología y detalles de simulación

El estudio de los problemas planteados se realiza mediante la simulación con el método de DM. Se utiliza el programa MDRANGE, una versión de DM especialmente desarrollado para el caso de energías suficientemente altas. El modelo del sistema consiste de N iones metálicos inmersos en un gas de electrones más una partícula ionizada que representa al proyectil o ion de retroceso.

La interacción entre los iones se describe mediante el potencial de ZBL [10] que tiene en cuenta el efecto del apantallamiento de los electrones libres.

* Correspondencia autor: jrojas@ipen.gob.pe

En los cálculos del alcance de los iones y las energías depositadas a altas energías (en la región de los keV), las interacciones entre los iones de retroceso y sus vecinos más cercanos son mucho más fuertes que las interacciones entre los otros átomos de la red cristalina.

Una de las características más resaltantes de MDRANGE es que está implementada la opción de tratar solo las interacciones del ion de retroceso o proyectil. Esta aproximación se conoce como aproximación de interacción de retroceso (RIA, del inglés Recoil Interaction Approximation).

Adicionalmente, en MDRANGE, a diferencia de los programas de DM tradicionales, el paso de tiempo de integración no es constante durante el proceso, lo que permite elevar la eficiencia del programa; además, la celda de simulación viaja junto con el ion de retroceso, como se ilustra en la Figura 1.

Detalles de simulación

Las principales magnitudes que se han calculado en el presente trabajo son:

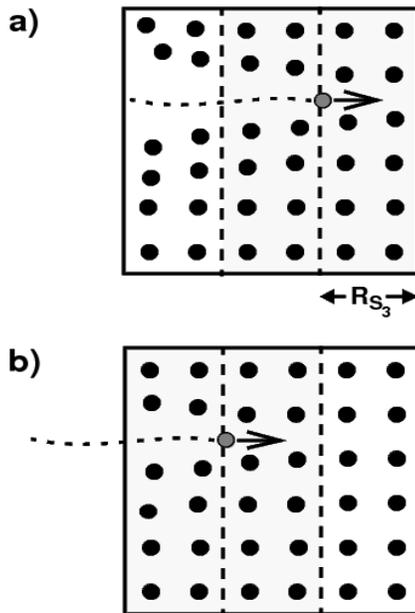


Figura 1. Vista bidimensional esquemática de cómo los átomos son movidos durante los cálculos del alcance de los iones. a) muestra al proyectil acercándose a una distancia RS_3 del borde de la caja de simulación. Cuando esto ocurre todos los átomos que se encuentran en la parte izquierda son retirados de la celda y nuevos átomos con posiciones no perturbadas son colocadas en el frente del proyectil b).

a) La pérdida de energía de los iones de retroceso o energía depositada en el cristal debido a la interacción con los electrones del sistema (frenado electrónico) y debido a la interacción con los núcleos atómicos (frenado nuclear).

b) Alcance de los iones de retroceso, caracterizado por la distribución o histograma de los iones de retroceso que resultan implantados a cierta distancia a partir del punto de origen. El proceso de seguimiento del ion de retroceso se detiene cuando su energía es menor que cierto valor (en nuestro caso, menor que 1 eV).

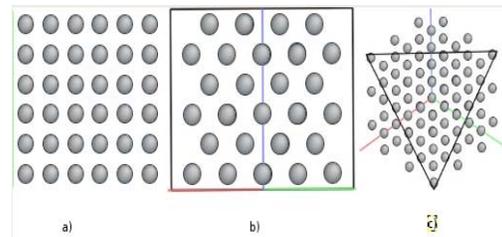


Figura 2. Planos cristalográficos en la estructura fcc, perpendiculares a las orientaciones a) [001], b) [110] y c) [111].

3. Resultados y Discusión

Como es conocido las fases estables a temperatura ambiente de los metales Al y Fe poseen estructura cristalina fcc y bcc, respectivamente. Es de esperar, que durante el proceso de implantación de iones en los monocristales la orientación mutua del cristal y el ion debe influir tanto en las características del alcance como en la distribución de la energía depositada en la red cristalina. Para aclarar estos efectos se ha estudiado la implantación de los iones He^{2+} con energía inicial de 10 keV en monocristales de Al y Fe. Se ha estudiado tres orientaciones del haz inicial respecto al monocristal: [001], [110] y [111]. En la Figura 2 se muestran los correspondientes planos cristalográficos para el caso del Aluminio.

En las Figuras 3 y 4 se presentan el alcance de los iones He^{2+} implantadas con energía inicial 10 keV a lo largo de diferentes orientaciones en monocristales de Al y Fe, respectivamente.

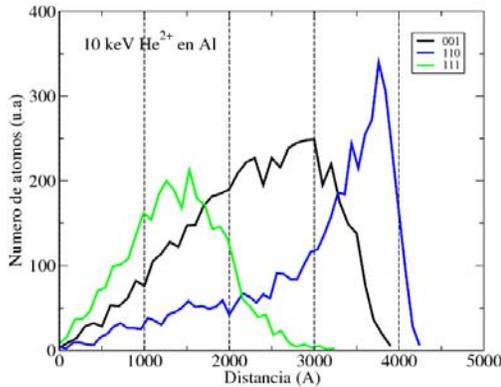


Figura 3. Alcance de los iones He^{2+} como función de la distancia en la irradiación del Al en dirección de los ejes a) [001], b) [110] y c) [111].

El programa MDRANGE permite calcular varios tipos de alcance: a) proyección sobre determinado eje, b) desplazamiento, es decir el módulo del radio vector que une la posición inicial y final del proyectil, c) la trayectoria o camino recorrido. En el presente trabajo se han calculado el alcance como la proyección sobre el eje en dirección del haz inicial. Como se puede apreciar de la Figura 3 en el Aluminio el alcance es mayor y una distribución más estrecha en la dirección [110]. En dirección [111], es decir perpendicular al plano más densamente ocupado por los átomos el alcance es menor, mientras que el alcance en dirección [001] toma un valor intermedio.

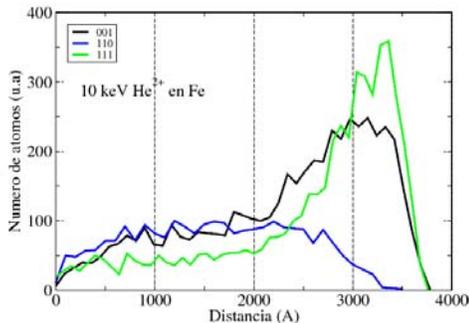


Figura 4. Alcance de los iones He^{2+} como función de la distancia en la irradiación del Fe en dirección de los ejes a) [001], b) [110] y c) [111].

En cambio, en los cristales con estructura bcc los iones de retroceso alcanzan mayor distancia en las direcciones [001] y [111], mientras que en la dirección [110] es mínimo con una distribución ancha. Es decir, la implantación

de los iones se puede canalizar a lo largo de ciertas orientaciones.

El proceso de propagación de He^{2+} con energía inicial 10 keV dura en promedio 1 ps. En la primera etapa del proceso, cuando la energía es todavía suficientemente alta, la trayectoria del ion es aproximadamente rectilínea, como se observa de la Figura 5.

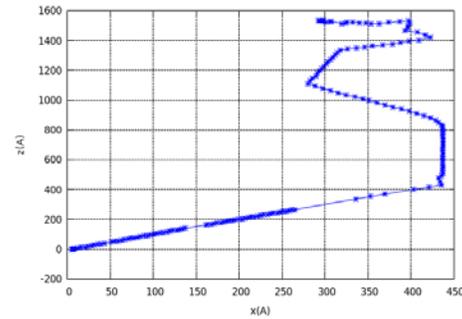


Figura 5. Proyección sobre el plano x-z de la trayectoria del He^{2+} con energía inicial de 10 keV en Al.

Implantación con iones de diferente energía

Con la finalidad de estudiar los procesos del poder de frenado y alcance de los iones como función de su energía inicial se ha simulado la irradiación del Al monocristalino con iones He^{2+} cuyas energías varían de 100 keV hasta 2470 keV. La dirección del haz inicial coincide con la orientación [001].

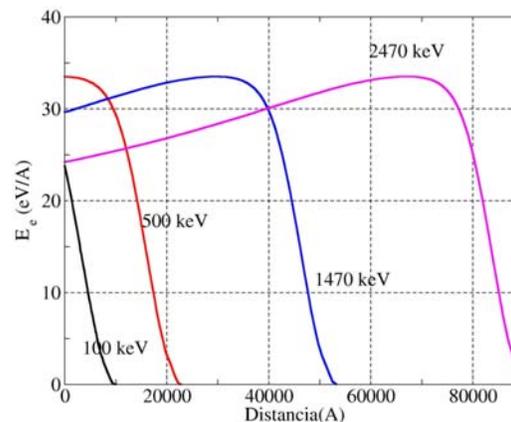


Figura 6. Frenado electrónico como función de la distancia en la irradiación del Al monocristalino con iones He^{2+} con energías iniciales de 100, 500, 1470 y 2470 keV.

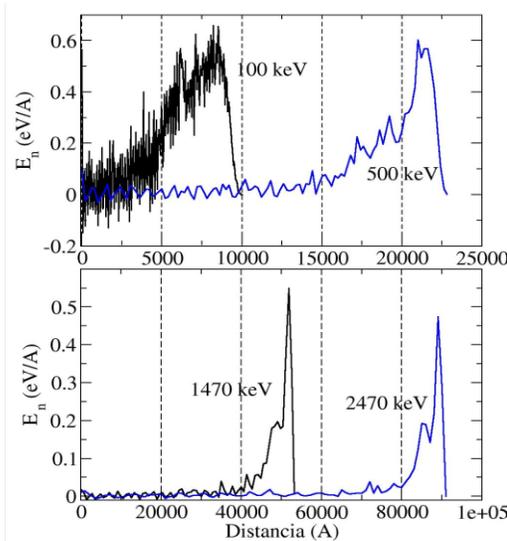


Figura 7. Frenado nuclear como función de la distancia en la irradiación del Al monocristalino con iones He^{2+} con energías iniciales de 100, 500, 1470 y 2470 keV.

En la Figura 6 se muestra la variación del poder de frenado electrónico como función de la distancia. El frenado electrónico es debido a la interacción del ion de retroceso con el gas de electrones libres del metal. Se aprecia que para energías menores que 100 keV el poder de frenado electrónico disminuye desde el comienzo, mientras que para valores de energía mayor, primero hay un incremento hasta alcanzar un máximo a cierta distancia y luego disminuye. Por otra parte, la componente del frenado nuclear, como se aprecia en la Figura 7, durante gran parte del camino varía muy poco y solamente al final del proceso hay un incremento significativo. Los resultados del comportamiento de los poderes de frenado con la distancia obtenidos en el presente trabajo se encuentran en buena concordancia con las predicciones de la teoría [9]. En las primeras etapas del proceso predomina el frenado electrónico y al final la componente nuclear. El desplazamiento de los átomos del cristal de su posición de equilibrio y, en consecuencia, el daño que genera los iones de retroceso se concentran a cierta distancia de la superficie.

En la Figura 8 se presenta el alcance de los iones He^{2+} con diferentes energías implantados en el Al monocristalino. Los resultados muestran en primer lugar que el alcance es proporcional a la energía inicial del ion, por

lo menos en el intervalo de energías analizadas la dependencia es lineal. En segundo lugar, la distribución se hace cada vez menos ancha con el incremento de la energía; es decir, la gran mayoría de los iones finalizan su recorrido en cierto rango de distancia localizada. Por ejemplo, gran parte de los iones con energía de 1470 keV resultan implantados entre 5 y 5.25 μm de la superficie.

Implantación de iones en Al y Fe policristalinos

Para aclarar la influencia del tamaño de los granos del material blanco sobre el alcance de los iones de retroceso y la energía depositada, se ha simulado la irradiación de los materiales policristalinos con iones He^{2+} cuyas energías iniciales son iguales a 500 keV. El tamaño de grano de los cristallitos considerados fueron iguales a 20,50,100,500, 1000, 5000 y 10000 Å. La orientación de los granos es aleatoria.

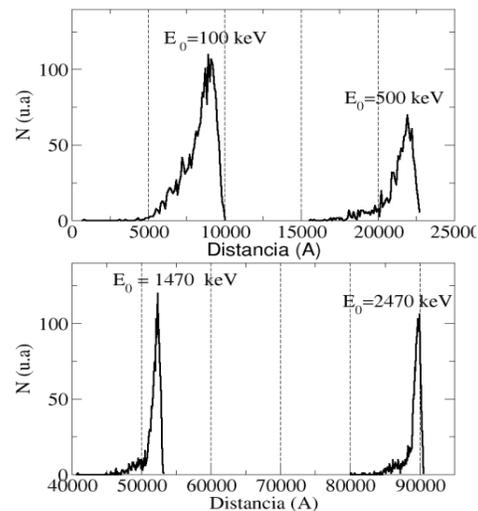


Figura 8. Alcance de los iones He^{2+} con distintas energías versus distancia en monocristal de Al. Número de eventos 1000.

La dependencia con la distancia del poder de frenado electrónico y nuclear del Fe con diferentes tamaños de los granos durante la implantación del He^{2+} se muestra en la Fig. 9. Se puede notar que con la disminución del tamaño de los granos la energía depositada tiende a aumentar, mas significativamente en las primeras etapas de la implantación. Y lo que es más importante la mayor variación se observa para los tamaños de grano menores que 50 nm. (500 Å). Similar comportamiento del poder de frenado del material se ha

observado también para el caso de Al policristalino.

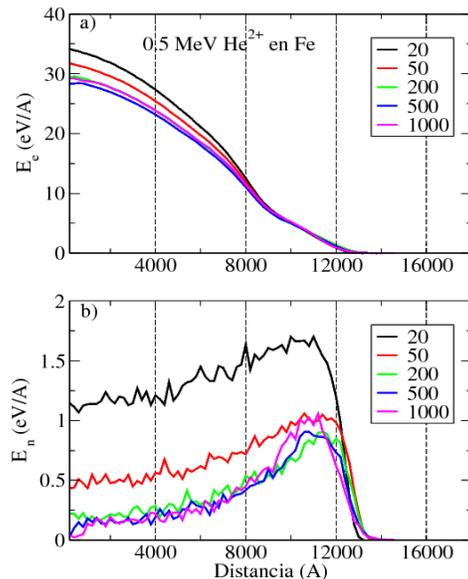


Figura 9. Frenado electrónico a) y nuclear b) como función de la distancia en la irradiación del Fe policristalino. Las gráficas corresponden a tamaños de grano 20, 50, 200, 500 y 1000 Å.

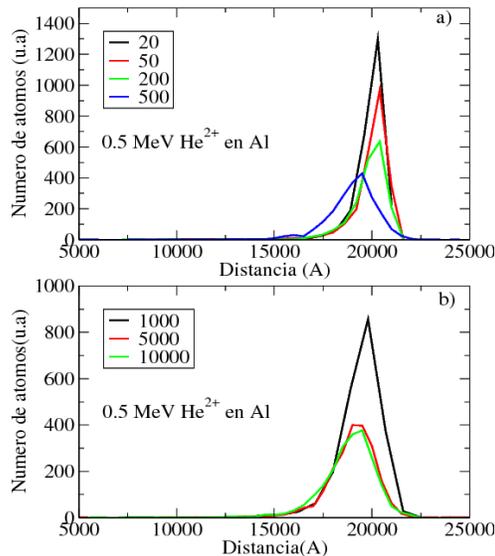


Figura 10. Distribución del alcance de los iones He²⁺ en aluminio policristalino. Número de eventos 5000.

En la Figura 10 se muestra la distribución del alcance de los iones He²⁺ en aluminio con diferentes tamaños de grano. A diferencia de la energía depositada, el pico del alcance de los iones para tamaños de grano hasta 500 Å no varía significativamente (ver Fig. 10 a), mientras que el ancho de distribución tiende a aumentar con el incremento del tamaño de

grano. Para tamaños de grano por encima de 5000 Å prácticamente ya no se nota diferencia alguna en la forma de la distribución de los iones implantados. Esto se debe probablemente que para la energía del ion de retroceso considerada el tamaño del cristalito ya es del mismo orden que el alcance en monocristales.

4. Conclusiones

Mediante la simulación con el método de dinámica molecular se ha estudiado los procesos de propagación de los iones He²⁺ en Al y Fe. Se ha establecido que en el aluminio la dirección de mayor alcance o canalización es [110], mientras que en el Fe esta dirección es el de menor alcance. El alcance de los iones es directamente proporcional a su energía en el intervalo de energías estudiada. No se ha observado una dependencia significativa del alcance de los iones con el tamaño de los granos de los metales estudiados.

5. Bibliografía

- [1] Lindner JKN. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1994; 84:153.
- [2] Juslin N, Nordlund K, Wallenius J, Malerba L. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2007; 255(1):75-77.
- [3] Zeng F, Zong RL, Gu YL, Lv F, Pan F, Wang J, Yan WS, He B, Xie YN, Liu T. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2007; 260(2):547-552.
- [4] Trachenko K, Dove MT, Salje EKH, Todorov I, Smith W, Pruneda M, Artacho E. Molecular simulation. 2005; 31(N5):355.
- [5] Lee N, Xue G, Greene J. J. Appl. Phys. 1996; 80:769.
- [6] Hayashi N, *et al.* Phys. Rev. Lett. 1993; 70:45.
- [7] Jacobsen J, Cooper B, Sethna J. Phys. Rev. B. 1998; 58(23):15847.
- [8] Nordlund K, Keinonen J, Kuronen A. Physica Scripta. 1994; T54:34.
- [9] Nordlund K. Com. Mat. Sci. 1995; 3:448.
- [10] Ziegler JF, Biersack JP, Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Matter. New York: Pergamon, New York; 1985.